

DETERMINACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURA MEDIANTE EL MÉTODO DE SUSTITUCIÓN DE DOMINIO EN EL LECHO DE LAS CELDAS DE REDUCCIÓN DE ALUMINIO DEL TIPO HALL-HEROULT

Edgar Gutiérrez[†] y Nando Troyani[‡]

[†] Centro de Estudios Energéticos
Departamento de Ingeniería Mecánica
Universidad Nacional Experimental Politécnica “Antonio José de Sucre”
Vicerrectorado Puerto Ordaz
E-mail: egutierrez@poz.unexpo.edu.ve
Página Web: www.poz.unexpo.edu.ve/Cee/Edgar_Gutiérrez.htm

[‡] Centro de Métodos Numéricos
Departamento de Ingeniería Mecánica
Universidad de Oriente, Núcleo Anzoátegui
E-mail: ntroyani@cantv.net

Palabras Claves: Celdas Hall-Heroult, Problema termoeléctrico, Sustitución de dominio, Reducción de aluminio, Lecho de celda.

Resumen: *La producción de aluminio mediante el proceso Hall-Heroult requiere gran cantidad de energía, 14.0 kwh/kgAl en vez de los 6.3 kwh/kgAl especificados por la teoría correspondiente. Este hecho ha impulsado el desarrollo de modelos matemáticos avanzados y más precisos que puedan contribuir al mejoramiento de la eficiencia de las celdas de reducción de aluminio (CRA) donde ocurre el citado proceso Hall-Heroult y en consecuencia disminuir el correspondiente consumo de energía. Una dificultad encontrada en la solución del problema termoeléctrico de la CRA, es la de la determinación de la posición del lecho, que siendo un borde libre que representa físicamente la interfase sólido-liquido se encuentra en el punto de solidificación del baño electrolítico. En este trabajo se resuelve el modelo que describe el proceso termoeléctrico que tiene lugar en las CRA a través de una estrategia basada en el método de los elementos finitos aplicada a la solución de un sistema acoplado de dos ecuaciones diferenciales parciales no lineales. De este modo, se determina la distribución de temperatura y, utilizando el método de sustitución de dominio se determina, simultáneamente, la posición del lecho, para el tipo de celda en estudio. En el trabajo se describe el algoritmo computacional utilizado y se presenta algunos resultados numéricos correspondientes a un modelo tridimensional.*

1. INTRODUCCIÓN

El proceso Hall-Heroult, para la producción industrial de aluminio, consiste en extraer el aluminio líquido mediante la reducción electrolítica de la alúmina (Al_2O_3) disuelta en un electrolito compuesto básicamente de criolita fundida (Na_3AlF_6). Otros materiales, tales como: fluoruro de aluminio (AlF_3), fluoruro de sodio (NaF), carbonato de sodio (Na_2CO_3), fluoruro de calcio (CaF_2), carbonato de litio (LiCO_3) y óxido de magnesio (MgO), son añadidos al electrolito para mejorar la eficiencia de operación de la celda.

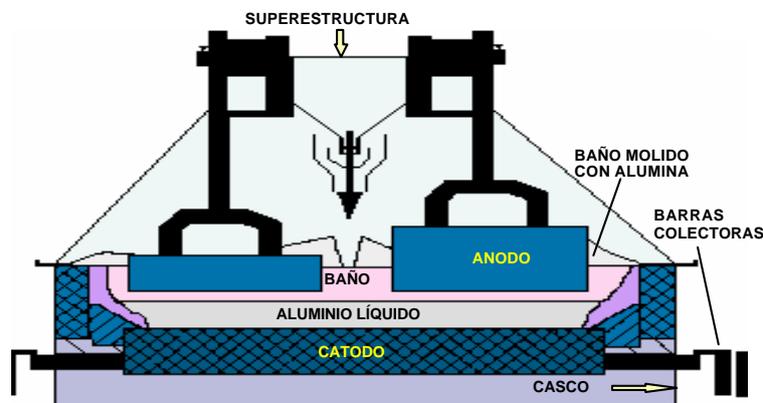


Figura 1. Esquema general de una celda Hall-Heroult

La reducción del aluminio se realiza en una celda electrolítica (Figura 1), también llamada celda de reducción de aluminio, que no es más que una estructura de acero en forma de caja rectangular abierta, llamada casco. El casco se encuentra recubierto en su interior por ladrillos refractarios que circundan al bloque de carbón catódico y a su vez sirve de vasija contenedora del electrolito y el aluminio líquido. Inmersos en el electrolito fundido (baño electrolítico) se encuentran los bloques de carbón combustible (ánodos) suspendidos de una estructura de acero (superestructura) que es soportada por el casco. Sobre los ánodos se encuentra una capa de baño electrolítico sólido y molido mezclada con alúmina, la cual cubre a los ánodos y sirve de protección de los ánodos contra la oxidación, además de servir de aislante térmico.

La corriente eléctrica (corriente continua) necesaria para la reducción de aluminio se introduce en la celda a través de los ánodos. Dentro de la celda, la corriente fluye a través del electrolito hacia el metal líquido (aluminio) y bloque catódico y sale por las barras colectoras. El hecho de que se requiere aproximadamente 14.0 kWh/kgAl en vez de 6.3 kWh/kgAl^1 especificados por su valor teórico, ha impulsado el desarrollo de modelos matemático avanzados y cada vez más precisos con la finalidad de mejorar la eficiencia de la CRA y en consecuencia disminuir el consumo de energía.

Entre las dificultades más importantes que se han encontrado para desarrollar un modelo tridimensional del comportamiento termo-eléctrico de una celda Hall-Heroult, se encuentran: la gran capacidad computacional que se requiere y la necesidad de ubicar mediante un proceso iterativo la interfase sólido líquido del Lecho (borde libre) en la isoterma que contiene la temperatura de solidificación del baño electrolítico.

En este trabajo se ubica a través de un proceso numérico de interpolación el lecho de la celda utilizando una técnica de sustitución de dominio, que, incorporada a un programa de elementos finitos, resuelve el problema termoeléctrico que tiene lugar en celdas de reducción de aluminio Hall-Heroult en estado estacionario

2. FUNDAMENTO MATEMÁTICO

2.1. Formulación Matemática

El proceso de reducción de aluminio que tiene lugar en una celda Hall-Heroult, es un problema extremadamente complejo porque se involucran múltiples fenómenos de transporte, reacciones químicas y electroquímicas, equilibrios de fases complejas, fenómenos termoeléctricos y magnetohidrodinámicos, entre otros. Por esta razón, para desarrollar el modelo matemático de la celda Hall-Heroult y simplificar la solución tridimensional del mismo a fin de poder hacerlo manejable desde el punto de vista computacional, se plantean las siguientes consideraciones^{2, 3, 4)}.

- El problema se abordará solamente como un problema termoeléctrico en estado estacionario.
- Se desprecia la transferencia de calor por radiación, debido a que la temperatura en los bordes externos es pequeña con relación a la del ambiente.
- En la fase líquida del metal y del baño electrolítico, sólo se tomará en cuenta la transferencia de calor por conducción, despreciando los efectos convectivos.
- La celda Hall-Heroult desde el punto de vista termoeléctrico se considera simétrica longitudinal y transversalmente.
- El perfil del lecho se ubica en la isoterma que contenga la temperatura de solidificación del baño electrolítico.

Bajo las consideraciones anteriores, la formulación matemática del problema termoeléctrico en estado estacionario se expresa de la siguiente manera^{3, 4)}:

Determinar la distribución de temperatura $T=T(x,y,z)$ y la de voltaje $V=V(x,y,z)$ en W_T que satisfacen el sistema de ecuaciones diferenciales parciales bidireccionalmente acopladas:

$$\nabla \cdot [k \nabla T] + \mathbf{s}_e [\nabla V]^2 = 0 \quad \text{en} \quad \Omega_T \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{s}_e \nabla V) = 0 \quad \text{en} \quad \Omega_T \quad (2)$$

Donde:

$k = k(x, y, z, T)$ Conductividad térmica

$\mathbf{s}_e = \mathbf{s}_e(x, y, z, T)$ Conductividad eléctrica

$T = T(x, y, z)$ Temperatura.

$V = V(x, y, z)$ Voltaje.

Y las siguientes condiciones de borde:

$$k(x, y, z, T) \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad \text{en} \quad \partial \Omega_s$$

$$-k(x, y, z, T) \frac{\partial T}{\partial n} = h_c (T - T_\infty) \quad \text{en} \quad \partial \Omega_c$$

$$\mathbf{s}_e \nabla V \cdot \hat{n} = -\bar{J}(x, y, z) \cdot \hat{n} = J_e(x, y, z) \quad \text{en} \quad \Gamma_A$$

$$V(x, y, z_o) = 0 \quad \text{en} \quad \Gamma_B$$

$$(\mathbf{s}_e \nabla V) \hat{n} = -\bar{J}(x, y, z) \cdot \hat{n} = 0 \quad \text{en} \quad (\partial \Omega_T - \Gamma_A - \Gamma_B)$$

Donde:

J : Densidad de Corriente.

\mathbf{W}_T : Dominio del problema.

$\partial \Omega_T$: Borde de \mathbf{W}_T .

$\partial \Omega_s$: Borde de simetría de $\partial \Omega_T$.

$\partial \Omega_c$: Borde de $\partial \Omega_T$ sometido a convección.

Γ_A : Superficie transversal por donde entra la corriente a la celda Hall-Heroult.

Γ_B : Superficie transversal por donde sale la corriente de la celda Hall-Heroult.

Además, el borde libre o lecho (Γ_L) debe satisfacer la siguiente ecuación:

$$T(x, y, z) = T_L \quad \text{en} \quad \Gamma_L \quad (3)$$

Donde T_L es la temperatura de solidificación del baño electrolítico y se determina con la ecuación de Sterten ⁴.

2.2. Representación por Elementos Finitos

La representación por elementos finitos de la temperatura, voltaje y las funciones de prueba u y w , son las siguientes:

$$T_h^e = \sum_{i=1}^{N_e} T_i^e \mathbf{y}_i(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \quad (\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \in \Omega_e \quad (4)$$

$$V_h^e = \sum_{i=1}^{N_e} V_i^e \mathbf{y}_i(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \quad (\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \in \Omega_e \quad (5)$$

$$u_h^e = \sum_{i=1}^{N_e} u_i^e \mathbf{y}_i(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \quad (\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \in \Omega_e \quad (6)$$

$$w_h^e = \sum_{i=1}^{N_e} w_i^e \mathbf{y}_i(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \quad (\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z}) \in \Omega_e \quad (7)$$

Donde $\mathbf{y}_i(\mathbf{x}, \mathbf{h}, \mathbf{z})$ son las funciones de forma asociada con cada nodo del elemento Ω_e , y pertenecen al espacio de funciones H^1 .

Mediante la representación por elementos finitos; el sistema de dos ecuaciones diferenciales parciales dada por las ecuaciones (1) y (2), se convierte en dos sistemas de ecuaciones linealizados al evaluar las propiedades térmicas con el estimado “anterior” de temperatura en el esquema iterativo utilizado, que se representan en cada elemento de la siguiente manera:

$$(\mathbf{k}^e + \mathbf{h}^e) \mathbf{T} = (\mathbf{f}^e + \mathbf{?}^e) \quad (8)$$

$$\mathbf{c}^e \mathbf{V} = \mathbf{d}^e \quad (9)$$

Donde las componentes de las matrices y vectores están dadas explícitamente por:

$$k_{ij}^e = \iiint_{\Omega_e} k \left(\frac{\mathbb{1} \mathbf{y}_i^e}{\mathbb{1} x} \frac{\mathbb{1} \mathbf{y}_j^e}{\mathbb{1} x} + \frac{\mathbb{1} \mathbf{y}_i^e}{\mathbb{1} y} \frac{\mathbb{1} \mathbf{y}_j^e}{\mathbb{1} y} + \frac{\mathbb{1} \mathbf{y}_i^e}{\mathbb{1} z} \frac{\mathbb{1} \mathbf{y}_j^e}{\mathbb{1} z} \right) dx dy dz$$

$$h_{ij}^e = \iiint_{\Omega_e} h \mathbf{y}_i^e \mathbf{y}_j^e dS$$

$$\begin{aligned}
 f_i^e &= \iiint_{\Omega_e} \mathbf{s}_e [\nabla V]^2 \mathbf{y}_i^e dx dy dz \\
 \mathbf{g}_i^e &= \iint_{\mathcal{A}\Omega_e} hT \mathbf{y}_i^e dS \\
 c_{ij}^e &= \iiint_{\Omega_e} \mathbf{s}_E \left(\frac{\mathcal{I}y_i^e \mathcal{I}y_j^e}{\mathcal{I}x \mathcal{I}x} + \frac{\mathcal{I}y_i^e \mathcal{I}y_j^e}{\mathcal{I}y \mathcal{I}y} + \frac{\mathcal{I}y_i^e \mathcal{I}y_j^e}{\mathcal{I}z \mathcal{I}z} \right) dx dy dz \\
 d_i^e &= \iint_{\mathcal{A}\Omega_e} J \mathbf{y}_i^e dS
 \end{aligned}$$

Los elementos que se utilizaron para desarrollar el código computacional fueron elementos ladrillos de 8 nodos, cuyas funciones de forma son polinomios lineales ^{5, 6}.

2.3. Método de Sustitución de Dominio

Para describir el método de sustitución de dominio se muestra en la Figura 2 un esquema general del código que resuelve el problema termoeléctrico.

En este algoritmo se debe proponer una posición inicial estimada del lecho dentro de la celda, luego se resuelve el problema y se verifica si el lecho propuesto coincide con la temperatura de solidificación de la alúmina. Si no coincide se interpola el lecho y se resuelve el problema nuevamente en un proceso iterativo de cálculo.

La interpolación del lecho se realiza siguiendo el algoritmo mostrado en la Figura 3. Se destacar, que para seleccionar los elementos que son sólidos o líquidos, del grupo inicialmente establecidos como posible región donde se encontrar el lecho, se debe verificar lo siguiente: Si al menos seis nodos de cada uno de los elementos tienen una temperatura mayor que la temperatura de solidificación del baño (T_{LECHO}), es líquido; de lo contrario es sólido.

La variable *CambioL* es la que define si hubo un cambio en la posición original del lecho. Se ha tomado como criterio de finalización del algoritmo iterativo la condición de que *CambioL* se menor que 0.05 del total de elementos inicialmente tomados como región donde se encuentra el lecho.

Para ilustrar el funcionamiento del código, en la Figura 4 se indican las etapas por la cual pasa la interpolación del lecho hasta que se alcanza la convergencia (Figura 4.c).

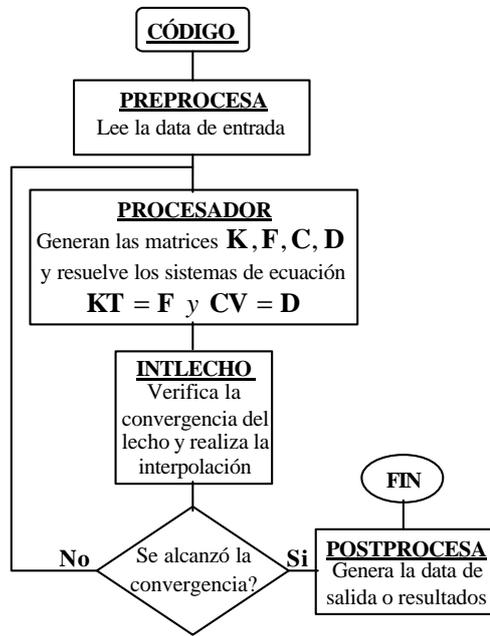


Figura 2. Algoritmo general de código que resuelve el problema termoeléctrico de la celda Hall-Heroult

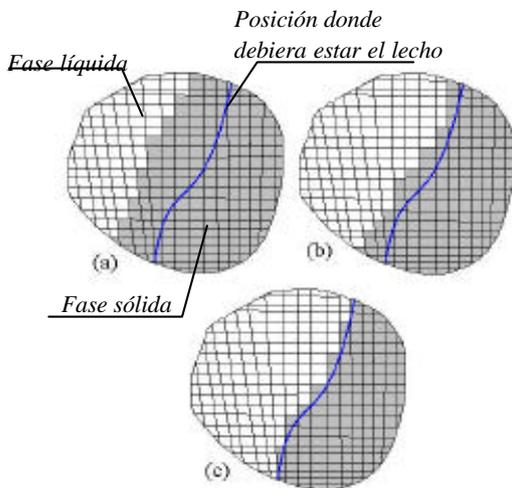


Figura 4. Esquema de la forma como se interpola el lecho. (a) Posición inicial propuesta. (b) una posición particular antes de alcanzar la convergencia. (c) Posición final cuando se alcanza la convergencia

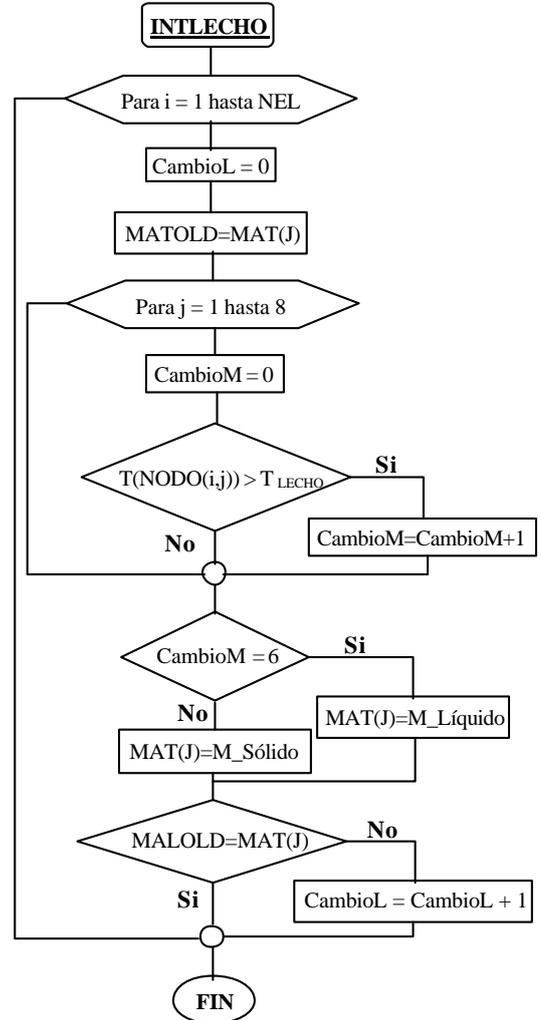


Figura 3. Algoritmo genérico del método de sustitución de dominio

3. RESULTADOS

3.1 Modelo de Elementos Finitos

EL modelo de elementos finitos utilizado se muestra en la Figura 5, y consta de 67060 nodos y 61506 elementos tipo ladrillo de 8 nodos. También se destacar en la Figura 5, la posición de lecho que se ha adoptado inicialmente y se muestra la isoterma (H) donde se solidifica el baño electrolítico y que es donde se debe ubicar la interfase sólido-líquido.

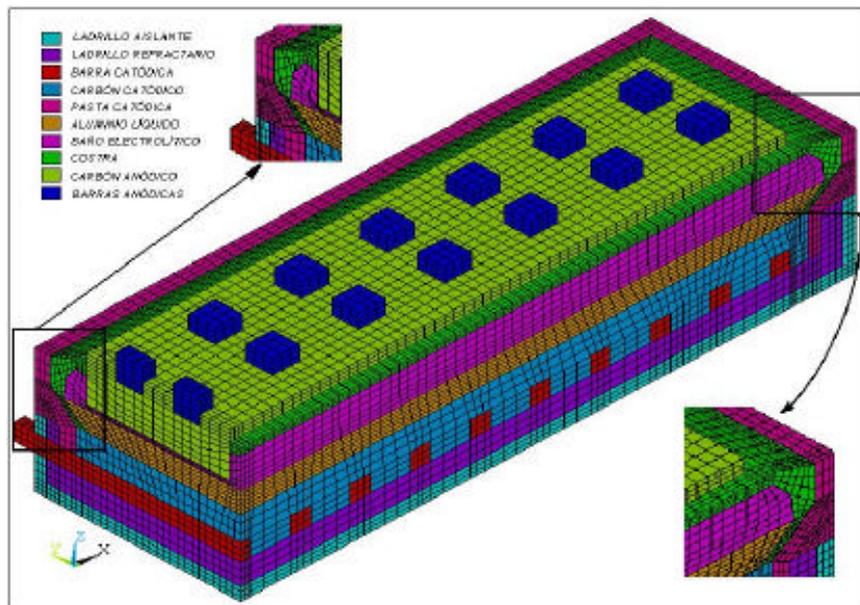


Figura 5. Modelo de elementos finitos de una celda Hall-Heroult tipo

3.2 Resultados de la Posición del Lecho

Después que se realiza la interpolación del lecho utilizando el método de sustitución de dominio, los resultados obtenidos después de 5 iteraciones se muestran en la Figura 6. Aquí se destaca que la curva H que es la isoterma de 960 °C donde se solidifica el baño electrolítico para los elementos sólidos (baño congelado). En el código ilustrado anteriormente se considera que un elemento es sólido cuando más de dos nodos tienen temperatura menor a la temperatura de solidificación del baño electrolítico.

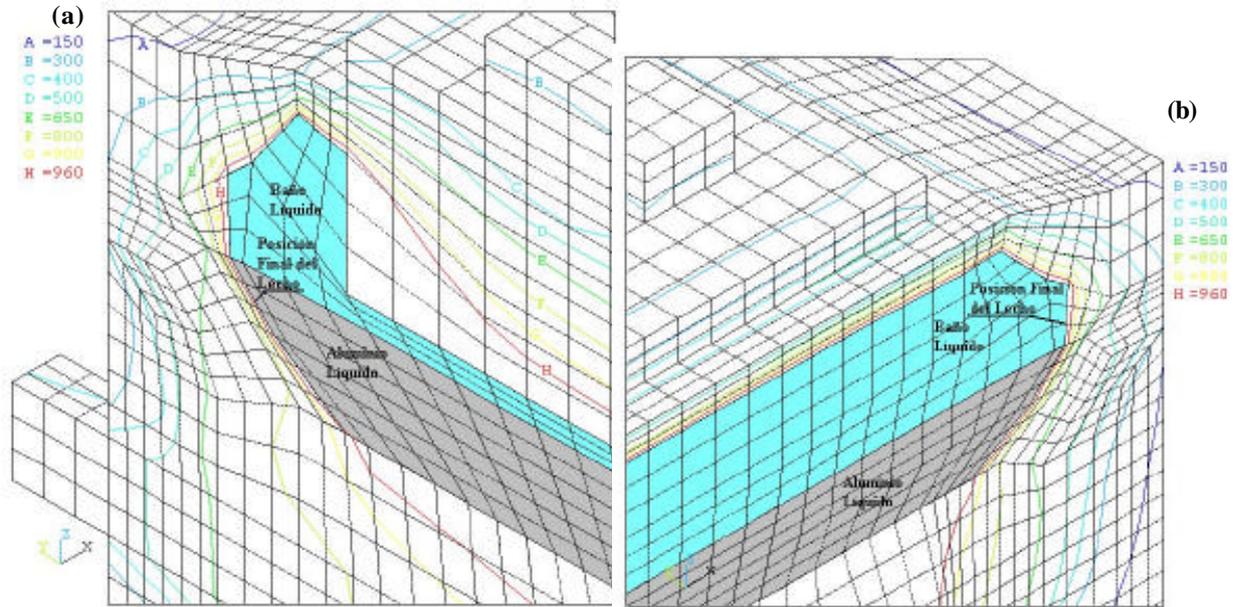


Figura 6. Posición final del lecho después de la interpolación. (a) Vista en el plano YZ, (b) Vista en el plano XZ

4. CONCLUSIONES

Se presenta, en este trabajo, el método de sustitución de dominio para establecer una aproximación a la posición de la interfase sólido líquido en CRA con el fin de poder así estudiar con mas precisión diversos asuntos relacionados con el funcionamiento de las CRA, entre otros, la influencia de la posición del lecho en la eficiencia resultante del proceso termoeléctrico.

La estrategia numérica presentada exhibe las necesarias características de convergencia pues, el proceso iterativo utilizado, posee un número finito de pasos que se corresponde con un número finito de elementos entre los cuales se puede cambiar las propiedades de los materiales a medida que avanzan los cálculos.

5. BIBLIOGRAFÍA

- 1) Llavona M.A., et al. "**Density, Hardness and Thermal Conductivity of Hall-Heroult Crusts**". Light Mateals, 1990, pp.429-437.

- 2) Gutiérrez, E. **“Modelación Tridimensional del Comportamiento Termoeléctrico de una Celda de Reducción de Aluminio Hall-Héroult”**. Tesis de Maestría UDO Núcleo Anzoátegui, Puerto la Cruz, 1999, pp. 106.
- 3) Gutiérrez, E. **"Formulación Variacional del Comportamiento Termoeléctrico de una Celda de Reducción de Aluminio Hall-Héroult en Tres Dimensiones"**. Universidad, Ciencia y Tecnología, Volumen 3, N° 9, Marzo 1999, pp. 25 – 29.
- 4) Gutiérrez, E. **"Algoritmos Computacionales para Resolver el Problema Termoeléctrico en tres Dimensiones en Celdas de Reducción de Aluminio del Tipo Hall Heroult"**. Universidad, Ciencia y Tecnología, Volumen 3, N° 12, Diciembre 1999, pp. 17–24.
- 5) Kai, Grjotheim, et al **"Understanding the Hall-Heroult Process for Production of Aluminium"**. Primera edición. Dusseldorf Alemania, Aluminium-Verlag. 1986, pp. 83-103.
- 6) Zienkiewicz, O. C y Taylor, R. L. **El Método de los Elementos Finitos**". Volumen I, Cuarta edición, Barcelona España, Mc Graw-Hill, 1994, pp. 650.
- 7) Becker, E. B., Carey G. F. and Orden J. T. **Finite Elements**". Volume I, New Jersey, Prentice Hall, 1981, pp. 258.